



TITLE:

マグネシウム合金の力学特性

AUTHOR(S):

馬淵, 守

CITATION:

馬淵, 守. マグネシウム合金の力学特性. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2015, 2014: 103-104

ISSUE DATE:

2015-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/197605>

RIGHT:

マグネシウム合金の力学特性

Mechanical properties of magnesium alloys

エネルギー科学研究科エネルギー応用科学専攻資源エネルギーシステム学分野 馬淵 守

背景と目的

マグネシウム(Mg)は実用金属中最も低密度であり、軽量材料として高いポテンシャルを有しており、比強度や比剛性、リサイクル性などの点でも優れているため、近年注目を集めている金属材料の一つである。しかしながら、Mg はその hcp 構造に起因する結晶構造の異方性が変形のすべり系を制限しており、その力学特性は実用材料である鉄鋼材料や、同じ軽量金属材料のアルミニウム合金とは大きく異なっている。すなわち、底面すべりがすべりやすくその他のすべり系(柱面すべり、錐面すべり)がすべりにくいという変形異方性を有している。そのため、Mg 合金の室温では、底面すべりに加えて、{10-11} 双晶と{10-12} 双晶と呼ばれる 2 種類の変形双晶がその変形を担っている。これらの 2 種類の双晶は、転位と相互作用を起こし、Mg 合金の力学特性に大きな影響を与える。このような特殊な力学特性を有する Mg 合金においては、その力学特性の制御のために、原子・電子レベルのシミュレーションからそのメカニズムを探求する手法が有用であると考えられる。本研究では、Mg 合金の力学特性に資する変形双晶の及ぼす影響を明らかにすることを目的に、これらの 2 種類の{10-11} 双晶、{10-12} 双晶と転位の相互作用を分子動力学シミュレーションを用いて解析した。

検討内容

本研究での分子動力学シミュレーションには、SCIGRESS を利用した。{10-11} 双晶、{10-12} 双晶をモデリングし、モデル左中央部より底面すべりのらせん転位を導入した。導入した転位は、図 1 に示すように Leading と Trailing の部分転位に分解し、モデルにせん断変形を加えることによりモデル中を移動する。計算の際のアンサンブルは NVT アンサンブル(N: 原子数、V: セルの体積、T: 温度を一定として取り扱う)を用いて、温度は 5 K に Nose-Hoover 法[1]を用いて制御した。原子間相互作用ポテンシャルは Tight-binding ポテンシャル[2]を用いた。境界条件は紙面に垂直な方向にのみ周期境界条件を適用し、それ以外の方向は表面の影響を排除するため最表面 2 層の原子を固定した。

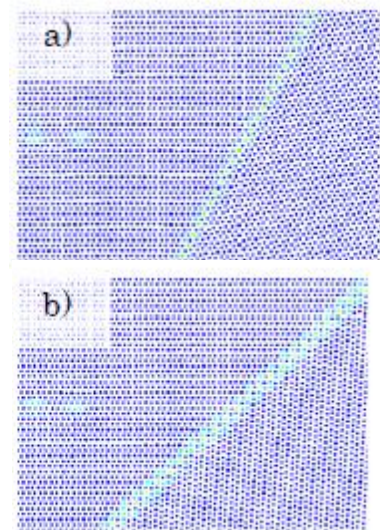


図 1 計算モデル:

(a) {10-11} 双晶、(b){10-12} 双晶

結果及び考察

図 2 に{10-11} 双晶と Leading 転位の相互作用の図を示す。{10-11} 双晶では、モデルに 0.5%のせん断ひずみを加えた時に、Leading 転位は大きな斥力が働くことなく、双晶面に吸収された。さらにせん断ひずみを加えていくと、図 3 に示すようにひずみ 1.2%で Trailing 転位も同様に双晶面に吸収され 2 つの転位が合体し、{10-11} 双晶面を移動していった。これは双晶転位という双晶を

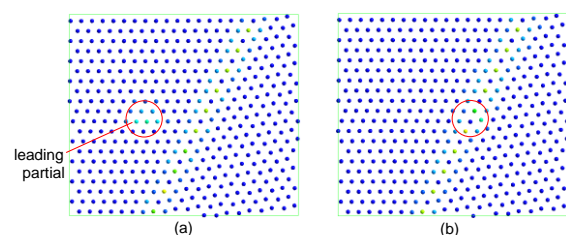


図 2 {10-11} 双晶と Leading 転位の相互作用

(a) ひずみ 0.5%, 9.6ps, (b) ひずみ 0.5%, 15ps

成長させる双晶転位と呼ばれる転位である。

図4に{10-12}双晶とLeading転位の相互作用の図を示す。{10-12}双晶では、モデルに0.7%のせん断ひずみを加えた時に、Leading転位は{10-12}双晶に到達するが、{10-11}双晶の時とは異なり、双晶面に吸収はされず、双晶面の直前に堆積した。Leading転位は最終的にひずみ1.3%を加えた時に双晶面に吸収され、このことから{10-12}双晶は転位との間に斥力相互作用を示すことがわかった。ここからさらにせん断ひずみを加えていくと、図5に示すようにひずみ1.5%でTrailing転位が双晶面に吸収され、2つの転位が合体し、双晶面を通過して双晶内の底面をすべっていった。

以上の底面らせん転位と双晶面の相互作用の違いについて、双晶エネルギーの観点から考察する。{10-11}双晶、{10-12}双晶の双晶エネルギーは、それぞれ81 mJ/m², 117 mJ/m²であり、{10-12}双晶の方がエネルギーが高く、乱れた原子構造を有していることが示唆される。実際に、{10-11}双晶、{10-12}双晶と転位の相互作用に必要なエネルギーバリアを計算した結果を図6に示す。図6に示される通り、{10-11}双晶は転位が双晶面に近づくときエネルギーが下がり、自発的に双晶面に吸収されることわかる。それに対し、{10-12}双晶は転位が双晶面に近づくときエネルギーが上昇し、近づくためには外部からエネルギーを供給することが必要なことがわかる。

以上のように、本研究により分子動力学シミュレーションを用いて、Mg合金に代表的な{10-11}双晶と{10-12}双晶の相互作用を明らかにすることができた[3]。今後は、合金元素を双晶面に添加した合金モデルを用いて、合金元素がこれら相互作用に与える影響を探求する予定である。

発表論文:なし

参考論文:

[1] S. Melchionna, G. Ciccotti, H.B.L. Hoover, Mol. Phys. 78 (1993) 533.

[2] F. Cleri, V. Rosato, Phys. Rev. B 48 (1993) .22.

[3] M. Yuasa, K. Masunaga, M. Mabuchi, Y. Chino, Philos. Mag. 94 (2014) 285.

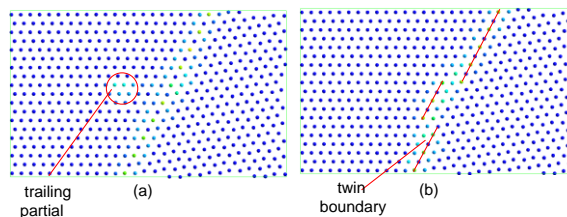


図3 {10-11}双晶とTrailing転位の相互作用

(a)ひずみ1.2%, 0.2ps, (b)ひずみ1.2%, 5.5ps

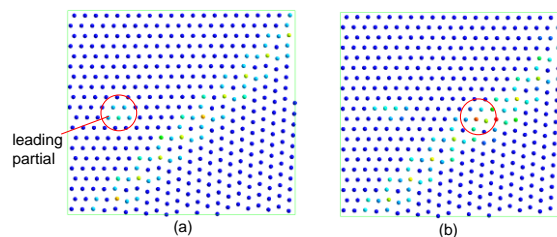


図4 {10-12}双晶 leading 転位の相互作用

(a)ひずみ0.7%, 2.1ps, (b)ひずみ1.3%, 8.6ps

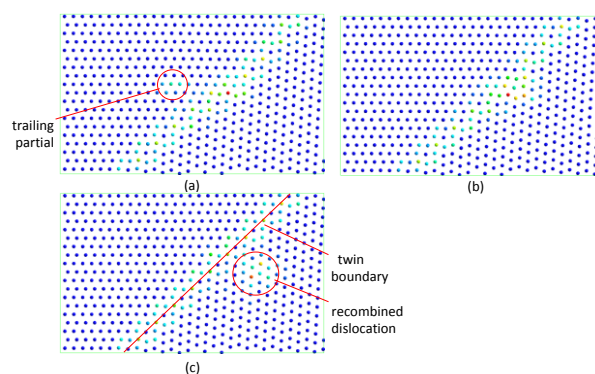


図5 {10-12}双晶とTrailing転位の相互作用

(a)ひずみ1.5%, 2.7 ps, (b)ひずみ1.5%, 9.1 ps, (c) ひずみ

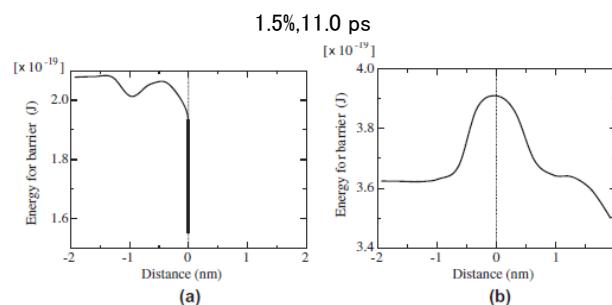


図6 双晶面と転位の距離とエネルギーバリアの関係

(a){10-11}双晶, (b){10-12}双晶